## 统计力学作业6

郑子诺,物理41

2025年3月30日

6.2

根据薛定谔方程, 我们有

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$$

由边界条件得

$$k = \frac{n\pi}{L}, n \in \mathbb{Z}$$

因此波矢空间内每 $\frac{\pi}{L}$ 有一个态。因而能量在 $\epsilon$ 内的态数为

$$\Omega(\epsilon) = \frac{L}{\pi} \sqrt{\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}}$$

求导得

$$D(\epsilon)d\epsilon = \frac{2L}{h}\sqrt{\frac{m}{2\epsilon}}d\epsilon$$

6.3

类似地,此时能量满足

$$k_1^2 + k_2^2 = \frac{2m\epsilon}{\hbar^2}$$

而 $k_1, k_2$ 满足

$$k_1 = \frac{n_1 \pi}{L}, k_2 = \frac{n_2 \pi}{L}, n_1, n_2 \in \mathbb{Z}$$

因此波矢空间每 $\frac{\pi^2}{L^2}$ 有一个态。因而能量在 $\epsilon$ 内的态数为

$$\Omega(\epsilon) = \frac{L^2}{\pi^2} \frac{\pi}{4} \frac{2m\epsilon}{\hbar^2}$$

求导得

$$D(\epsilon)d\epsilon = \frac{2\pi L^2}{h^2}md\epsilon$$

6.4

与前同理, 唯一改变的是能量与波矢的关系, 此时为

$$\epsilon = c\hbar\sqrt{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2}$$

因此能量在ϵ内的态数为

$$\Omega(\epsilon) = \frac{L^3}{8\pi^3} \frac{4\pi}{3} \frac{\epsilon^3}{c^3 \hbar^3}$$

求导得

$$D(\epsilon)d\epsilon = \frac{4\pi L^3 \epsilon^2}{h^3 c^3} d\epsilon$$

7.1

根据 $V = L^3$ , 我们有

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial V} = -\frac{2}{3} \frac{1}{2m} \frac{h^2}{V^{\frac{5}{3}}} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = -\frac{2}{3} \frac{\epsilon}{V}$$

所以

$$P = \sum -a_i \frac{\partial \epsilon_i}{\partial V} = \frac{2}{3} \frac{1}{V} \sum a_i \epsilon_i = \frac{2}{3} \frac{U}{V}$$

7.2

类似上题, 我们有

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial V} = -\frac{1}{3}c\frac{h}{V^{\frac{4}{3}}}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)^{\frac{1}{2}} = -\frac{1}{3}\frac{\epsilon}{V}$$

所以

$$P = \sum -a_i \frac{\partial \epsilon_i}{\partial V} = \frac{1}{3} \frac{1}{V} \sum a_i \epsilon_i = \frac{1}{3} \frac{U}{V}$$

7.3

我们有

$$Z_l^* = \sum \omega_i e^{-\alpha - \beta \epsilon_i^*} = \sum \omega_i e^{-\alpha - \beta (\epsilon_i + \Delta)} = e^{-\beta \Delta} Z_l$$

此时热力学函数分别为

$$U^* = -N \frac{\partial \ln Z_l^*}{\partial \beta} = U + N\Delta$$
 
$$Y_k^* = -\frac{N}{\beta} \frac{\partial \ln Z_l^*}{\partial y_k} = Y_k$$
 
$$S^* = Nk \left( \ln Z_l^* - \beta \frac{\partial \ln Z_l^*}{\partial \beta} \right) = S$$

$$F^* = U^* - TS^* = F + N\Delta$$

7.6

(1)当存在n个缺陷和填隙原子时,我们有 $C_N^n$ 种可能的缺陷位置,以及 $C_N^n$ 种可能的填隙位置,根据乘法原理我们有

$$S = k \ln \Omega = k \ln(C_N^n)^2 = 2k \ln \frac{N!}{(N-n)!n!}$$

(2)我们有

 $F = nu - TS \approx nu - 2kT\ln N! + 2kT(n\ln n - n) + 2kT[(N-n)ln(N-n) - (N-n)]$ 

对n求导为零得

$$u + 2kT \ln n - 2kT \ln(N - n) = 0$$

所以

$$\frac{n}{N} \approx \frac{n}{N-n} = e^{-\frac{u}{2kT}}$$

$$n = Ne^{-\frac{u}{2kT}}$$